

Será apresentado neste trabalho um programa que simula a interdifusão de átomos em interfaces metálicas, aplicado a um sistema bidimensional quadrado, constituído por uma matriz de 420 x 39 elementos. Numa metade da matriz colocamos a espécie 1, com maior coeficiente de difusão, e, na outra, a espécie 2 com menor coeficiente. As três colunas centrais foram completadas com vacâncias a fim de simular o contorno de grão. Além destas, são distribuídas aleatoriamente vacâncias em cada um dos metais. A porcentagem das mesmas é definida no início da simulação. Em seguida, o algoritmo sorteia dois números aleatórios que definem um elemento qualquer da matriz. Se este for uma lacuna, é feita a análise dos elementos vizinhos determinando-se aquele que tem prioridade para ocupá-la e procede-se à troca de posição do átomo e da vacância. Em caso contrário, repete-se o sorteio. Para manter o equilíbrio termodinâmico, o algoritmo possui uma subrotina que mantém constante a densidade de lacunas em pequenas regiões da amostra. Terminada a simulação, podemos extrair os dados por meio de um gráfico de concentração X distância e um arquivo de dados.(CNPq)